逻辑与神经之间的桥

甄景贤 (King-Yin Yan)

General. Intelligence@Gmail.com

Abstract. 本篇讨论经典逻辑 AI 和神经网络之间的一个对应关系,探讨二者的数学结构。逻辑规则 (rules) 可以利用变量表达,对应於空间中的一些 diagonals,这种泛化方式比神经网络的基於 smooth function 和邻域的泛化更强。有可能结合二者的结构,亦即增加 inductive bias,达到加快学习的目的。

逻辑 AI 那边,「结构」很抽象符号化,但**学习算法**太慢;我的目的是建立一道「桥」,将逻辑 AI 的某部分结构**转移**到神经网络那边。

这个问题搞了很久都未能解决,因为逻辑 AI 那边的结构不是一般常见的数学结构,单是要要表述出来也有很大困难。直到我应用了 model theory 的观点,才找到满意的解决方案:

$$F = \text{logic system}$$

$$x \cup \text{KB} \models x'$$

$$x = \text{model}$$

$$x = \text{mental state}$$

$$F = \text{recurrent deep NN}$$

$$x = \text{mental state}$$

$$x = \text{mental state}$$

$$(1)$$

首先解释 neural network 那边的结构,然后再解释 logic 那边的结构。

1 神经网络的结构

一个 神经网络 基本上是:

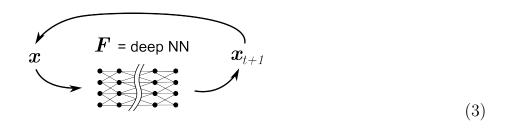
每层的**权重**矩阵 总层数
$$F(\boldsymbol{x}) = \mathcal{O}(W_1 \mathcal{O}(W_2...\mathcal{O}(W_L|\boldsymbol{x})))$$
 (2)

∅ = sigmoid function, applied component-wise (其作用是赋予非线性)

② 作用在 x 的每个分量上,它的作用在座标变换下**没有不变性**。所以 ② 不是一个向量运算,从而 $X \ni x$ 的结构也不是**向量空间**的结构。通常习惯把 \vec{x} 写成向量形式,但这有点误导。

如果将神经网络**首尾相接**造成迴路,这是一种智能系统的最简单形式。举例来说,如果要识别「白猫追黑猫」的视像,「猫」这物体要被识别两次,很明显我们不应浪费两个神经网

络去做这件事, 所以 迴路 是必须的:



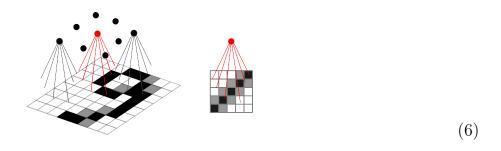
它的状态方程是:

离散时间
$$\boldsymbol{x}_{t+1} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_t)$$
(4)连续时间 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ (5)

由此可以看出,ℤ是一个微分流形。更深入地讲,它是一个力学上的 Hamiltonian 系统,具有 symplectic(辛流形)结构。但这超出了本文範围,详见本篇的姊妹作 [16]。

现在思考一下,神经网络怎样识别模式,或许会有帮助....

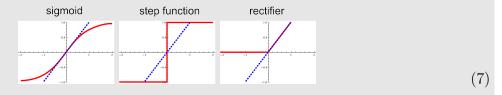
考虑最简单的情况,例如提取数字 "9" 的特徵的一层网络。这层网络可以有很多神经元 (左图),每个神经元局部地覆盖输入层,即所谓视觉神经元的 local receptive field (右图)。



假设红色的神经元专门负责辨识「对角线」这一特徵。它的方程式是 $y = \mathcal{O}(Wx)$ 。矩阵 W 的作用是 affine「旋转」特徵空间,令我们想要的特徵指向某一方向。然后再用 \mathcal{O} 「挤压」想要的特徵和不想要的特徵。Sigmoid 之后的输出,代表某类特徵的存在与否,即 $\{0,1\}$ 。这是一种资讯的压缩。

叉开话题, 讲一点 chaos theory:

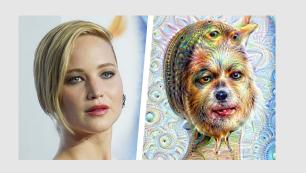
 \bigcirc 1 的作用是「扯」(stretch),将本来邻近的两点的距离非线性地拉远。看看以下各种常见的激活函数,它们全都是相对於 identity y=x 的非线性 deformation:



这和 Steven Smale 提出的「马蹄」[12] 非常类似,它是制造混沌的处方之一。Smale 马蹄的另一个变种叫做 baker map,其作用类似於「搓面粉」。换句话说,「拉扯」然后放回原空间,如此不断重复,就会产生混沌 [3] [13]。

这里有一点重大意义: F^{-1} 有混沌的典型特徵: 它「对初始状态的微少变化非常敏感」。根据我的观点,神经网络的正向运作是 pattern recogntion = 资讯压缩,反向是反压缩。反向的时候,因为同一概念可以对应於很多不同的输入($F^{-1}(x)$ 可以是很多 patterns),所以输出的微少变化(例如 0.99 和 0.98)会造成 F^{-1} 的极大起伏,换句话说即是有混沌现象。换句话说 F 的逆是 unpredictable 的,简言之,神经网络 F 是不可逆的压缩过程。

最近一个有趣的例子是 DeepDream [1],它用神经网络的 \mathbf{F}^{-1} 产生有迷幻感觉的 pre-image,证实了 \mathbf{F}^{-1} 可以和原本的 image 差距很大:



(8)

在神经网络的正向运作时似乎没有这种 "stretching",这似乎不会产生混沌,而且根据 contraction mapping theorem,F 的 iteration 会终止於 fixed point(s),但前提是 F 是 contractive 的,换句话说 the spectral radius of the Jacobian matrix of $F \leq 1$,但这一点我暂时未能确定(如果对 W 没有限制,这似乎不成立)。

另方面,如果反向是混沌,正向似乎也应该是混沌;在 ergodic theory 里可以计算动态系统的 topological entropy,而这个 entropy 的值是 time-reversal invariant 的。我暂时不清楚如果用别的 entropy 计算会不会不同,有待请教一下 ergodic theory 方面的人....?

总括以上,可以归结出一些原则:

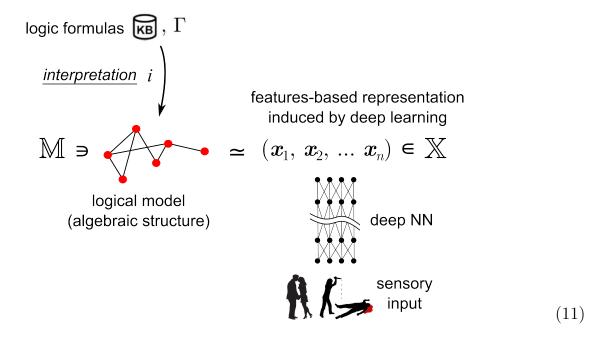
• 每个神经元的输出代表某个 feature 的存在与否 • 更高层的神经元代表下层 features 之间的**关系** (9)

这些原则暂时未能严格地表述和证明,或者可以叫它做 神经原理 (Neural Postulate)。

凭这个思路推广,可以推测这样的 correspondence:

$$\mathbb{M}$$
 \simeq \mathbb{X} 逻辑物体 \bullet \Leftrightarrow neuron (10) 逻辑关系 \bullet \Leftrightarrow relation between higher and lower neurons

从 model theory 的角度可以这样理解:



2 逻辑的结构

一个逻辑系统可以这样定义:

- 一些 constant symbols, predicate symbols, 和 function symbols
- 由上述的原子建立 命题 (propositions)
- 命题之间可以有连接词: ¬,∧,∨等
- 建立 逻辑后果 (consequence) 关系: $\Gamma \vdash \Delta$

逻辑 AI 的 learning algorithm 叫 ILP (inductive logic programming),这已经是一个 well-established field,如有兴趣可参看我的 ILP tutorial(这版本有点旧,有待更新)[14] 或 de Raedt 的教科书 [10]。ILP 在逻辑式子的符号空间中进行 combinatorial search,缺点是太慢。神经网络的 gradient descent (ie, back-propagation) 快很多,暂时未知是不是要混合这两种算法,还是只用 back-prop....?

我们的目的是将逻辑的结构 transfer 到神经网络。逻辑的结构有两方面:

• 命题的内部结构 (sub-propositional structure)

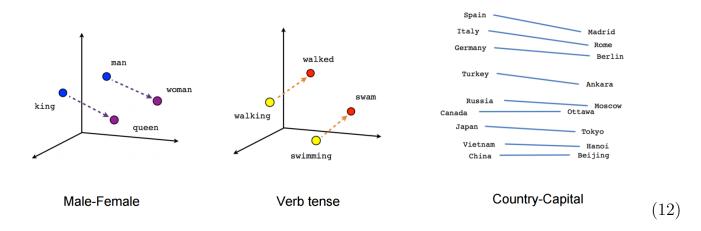
• 多个命题的集合(=记忆的结构)

以下分述之。谓词逻辑的命题结构比较特别,所以我初时专注於分析它。但后来发现《记忆的结构》[15] 更为基本,这是我们第 3 篇论文的题目。

2.1 逻辑命题的结构

Semantic distance 5 Compositionality

我们的目的是想将整套逻辑 AI 的器材搬到 连续 的微分流形上去实现。这个做法,是受了 Google 的 Word2Vec [9] 算法的启发,它可以将自然语言的词语 embed 到度量空间中,而且词语之间的距离是 semantic distance (语义学上的距离):



当然,word2vec 一经发表之后,很多人开始构思怎样把「句子」也 embed 到度量空间上。第一个想法当然是用 $tensor\ product$,例如 "I love you" 这句子就变成了 $I \otimes love \otimes you$ 。

但这个做法表面上很好,但细思之下却有问题。在语言学/逻辑学里有一个重要概念叫 compositionality,它说:

合成物的语义 (semantics) 由其所构成的原子生成,而不依赖於其他资料 (13)

例如「我爱你」由「我、爱、你」三个原子组成。

举个例子,以下这些句子的意义相近:

- pot calling the kettle black
- 五十步笑百步
- Those who live in glass houses should not throw stones
- 其身不正

虽然可以想像这些句子之间(粗略地)可以建立一一对应,但仍然很难想像用「乘积」乘出来的位置会相近,因为这牵涉到每个词语在句子中的 interpretation *。所以句子的意义不是简单地由词语 bottom-up 生成的。

用 tensor product 的做法,得出的空间结构是 syntactic 而不是 semantic 的,但神经网络学习的重点是 泛化 (generalization),它基於「邻近的点的意义相近」才能成功,所以一定要 semantic distance。

基於 "features" 的逻辑

上节看到 tensor product 的做法似乎有问题,它用原子 "algebraically" 组合成句子,原子之间的距离可以是语义学相近的,但「乘出来」的句子在语义空间上的位置可能 **很不准确**。另一方面,在神经网络里,「状态」x 是由一组 features 组成的,换句话说,它是一些features 的 conjunction(也可以看成是乘积)。两者都是乘积,但前者有问题,因为它是由自然语言的字 / 词构成的,而后者是由概念原子 (conceptual atoms / features) 构成的。所以,如果我们避免将自然语言的字 / 句 naïve 地映照到 representation 上,使用概念原子的乘积应该没有问题。

暂时只考虑一个 thought (= 命题)如何表示。

假设思维空间的 metric 是语义的 (语义相近则点的距离相近)。根据「神经原理」(9),每个 thought 必然是由一组 features 表述,例如 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$,每个 x_i 是一个概念原子。

记得逻辑学历史中 George Boole 曾经提出过一种逻辑 **,例如 x 代表「是人的」,y 代表「会死的」,那么「所有人都会死」就是:

$$x\left(1-y\right) = 0\tag{14}$$

这里 x, y 是 "classes",乘法是集合的 intersection,即 \cap 。这种乘法和上面描述的句子 / 词语乘法不同; 首先,这乘法是 commutative 的, $x \cap y = y \cap x$ 。如果将一个 thought 表示为:

$$\mathbf{x} = x_1, x_2, ..., x_n = x_1 \cap x_2 ... \cap x_n \tag{15}$$

则这些 x_i 可以看成是将所有思维的空间用「二分法」切割,每个 x_i 是一个二分切割。

两个 thoughts 之间的距离可以用 Hamming distance 量度,它是一个 semantic distance,尤其是当 n 比较大时,可能是一个效果不错的 metric。

总括来说: 「二分法」逻辑用一组 binary features 去定义一个 thought,一条思维是 n-维 hypercube 上的一个顶点。

^{*}例如,"pot"象徵有污点的人。经典 AI 研究者 Jerry Hobbs 开发了自然语言智能系统 Tacitus [5] [4](这个字有「沉默」的意思),他的理论是基於逻辑上的 abductive interpretations(即逻辑上反方向推导,寻找句子意义的解释),没有这种解释的话,将句子分拆成词语 并不足以组成句子的完整意义;亦即是说,naïve compositionality 在人类语言中并不成立。

^{**} 这和后世为他命名的 Boolean logic 不同。

逻辑中的 linkage 现象

在经典**谓词逻辑** (predicate logic) 中有一个 "linkage" 的现象,例如以下这个式子(爸爸的爸爸是爷爷):

$$\forall X \ \forall Y \ \forall Z. \ \operatorname{grandfather}(X, Z) \leftarrow \operatorname{father}(X, Y) \land \operatorname{father}(Y, Z)$$
 (16)

那意思是说,无论右边的变量(例如 X)怎样改变,左边的 X 必须代入相同的值。这是 代入 (substitution) 的本质。

我们想将 predicate logic 的结构「搬到」神经网络,从抽象意义上说可以有很多种做法,现我讲述一种我设计的比较简单直接的做法:

状态空间的 transition $x \mapsto y$ 看成是逻辑推导 $x \vdash y$,那么 linkage 就是 x 的 i-分量到 y 的 j-分量的 identity map。换句话说,有形如下式的一些 id maps 「埋藏」在 F 里面:

$$\mathbf{F}: (x_1, ..., \mathbf{x_i}, ..., x_n) \mapsto (y_1, ..., \mathbf{y_j}, ..., y_n)$$

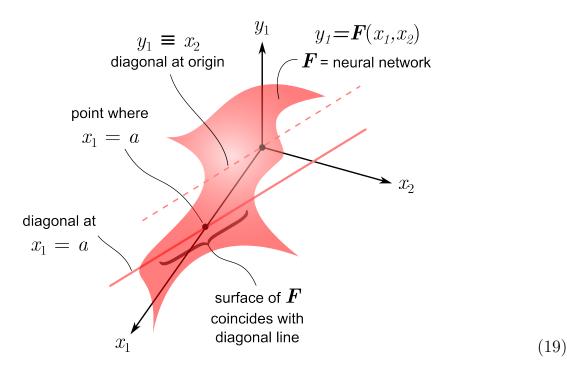
$$(17)$$

注意,我说「埋藏」的意思是:这些 linkage 只在 x 的某些位置才存在 (例如,当前提中出现了两个关於「爸爸」的命题时)。更准确地说:

$$\boldsymbol{F}: \begin{cases} y_{j} \equiv x_{i}, & \text{if } \boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{a}} \text{ for some coordinates except } x_{i} \\ y_{h} \equiv x_{k}, & \text{if } \boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{b}} \text{ for some coordinates except } x_{k} \\ \dots \text{ etc } \dots \\ \text{is free otherwise} \end{cases}$$
(18)

以上每条等式代表一个 linkage。

一个 linkage 的几何图像如下:

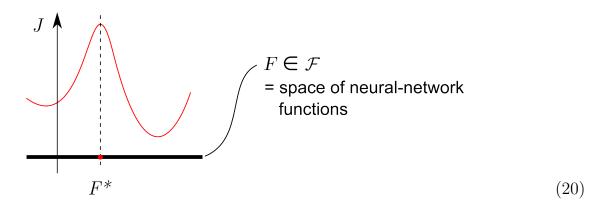


实际应用中 $\dim x$ 可能达到成千上万,其中可以有很多 $\lim x$ Usualize。

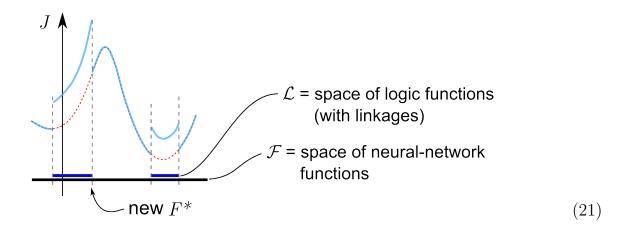
或者稍为形象化地解释一下: generalization 是智能的一个重要方面,例如由「苏格拉底会死、柏拉图会死」generalize 到「所有人都会死」这样的规律。这种泛化的 propensity 是一把双刃剑: 有时候可以很聪明,但有时候过度泛化。例如有些男人被女性欺骗后,从此觉得所有女人都说谎。神经网络是一个空间中的 smooth function,它泛化的方法是靠 smoothness: 某点的函数值改变时,该点的邻域的函数值也随著类似方向改变。神经网络本身没有那种 diagonal 式的泛化倾向(那是逻辑的特徵),但可以模拟它。神经网络F 对应於逻辑中的 \vdash ,即是由一些**前题**推出结论;F 是一个非常高维数的空间上的一个 hyper-surface。F 里面包含著各种 logic rules,例如在「人」和「死」这些位置上埋藏了「所有人都会死」这个 diagonal;而在「爸爸」和「爷爷」之间埋藏了「爸爸的爸爸是爷爷」这个 diagonal。F 的函数曲面必须经过这些 diagonals。如果没有逻辑的约束,F 的函数曲面就是自由的 smooth function 了。

Now, 我们关心的是怎样 "combine" 逻辑结构和神经网络结构。在这里我再选择一个特别简单的方法: 在 (18) 中的那些等式,构成了一些约束在神经网络的 W 之上的 equational constraints。只需要用这些 constraints 去训练神经网络,就可以实现 linkages。

传统的 back-prop 搜寻 \mathbf{F} 的最优值 \mathbf{F}^* ,J 是 score-function,注意底下的 domain 是 泛函 空间 (function space):



而我们需要的是新的 back-prop,它在「混合」的 function space 上 optimize(至於 exactly 怎样混合我还不清楚),J 在 logic 的 sub-space 上分数较高:



根据神经网络的 universal approximation theorem [2], L>1 层神经网络的函数 F 在函数空间中是 dense 的。换句话说,如果神经元的个数充分多,必然可以学习有任意 linkages 的函数。

如果还有疑惑,可以试试实际上 solve 一个 constraint。为简单起见,弃用 \bigcirc 而用 \bigcirc (反正实践中很多深度网络都用 rectifier),这样很方便,因为 rectifier 的前半截就是直线的 identity function。粗略地看,如果只有一层,那 constraint 约束了矩阵 W 的其中一行(有n 个分量);每个 linkage 使用 2 个自由度(\equiv 等式使用 1 度,if-then 使用 1 度)。当层数增加时,涉及到的 W 数目递增,而约束等式仍然只是一条,换句话说,应该有很多的自由度可以用。这情况是乐观的。

注意: 暂时我还未设计出使用 linkage 的 learning algorithm, 我也不肯定使用了 linkage 之后会不会对学习速度有重大改进....?

用 relation algebra 如何?

以前曾经对 relation algebra [11] [8] 有些幢憬,因为它比较接近人类自然语言,但其实 relation algebra (RA) 和 first-order logic (FOL) 基本上是等效的,在 FOL 里面有 linkage 的复杂性,但在 RA 里面这个复杂性其实也没有消失。可以说「复杂度是守恒的」***。

举例来说,在 (16) 中表达「爸爸的爸爸是爷爷」,可以用 RA 更简单地表达:

$$father \circ father = grandfather \tag{22}$$

实际的推导是这样的:

这时要 代入 上面的等式才能得出结论:

所以 linkage 的复杂性变成了代数 formula 长度的复杂性。

「长度」本身没有不妥,但我们的目的是将逻辑式子嵌入到状态空间 x 里,这时 variable length 令人很头痛,但 fixed length 没有此问题。如果硬要将 variable length 的式子嵌入到(有限维)向量空间中,似乎必须用到fractal 结构(因为它有自相似性),同时需要设计一种新的神经网络,它先天性地有 fractal 结构在里面;但这比较复杂,我没有在这方向 explore。

逻辑结构 summary

逻辑命题的**内部** (sub-propositional) 结构,传统上有两种方法表达: 一是 predicate logic, 二是 relation algebra。无论是哪种方式,它的本质都是想处理 variable substitution。有趣的是,「代数」的本质其实也是「代入」,但代数中的代入法则是 implicit 的,所以用代数来 explicitly 表达代入的概念反而很难。

^{***} 这句话是 category theorist Eugenia Cheng 说的。

至於 λ -calculus,它本质上就是一种处理 substitution 的方案。而 combinatory logic 和 λ -calculus 是等效的,后者消除了「变量」这概念,但取而代之的是式子的长度更复杂(比 relation algebra 更复杂)。

(First-order) predicate logic 的代数化,可以由 Alfred Tarski 的 cylindric algebra 给出:

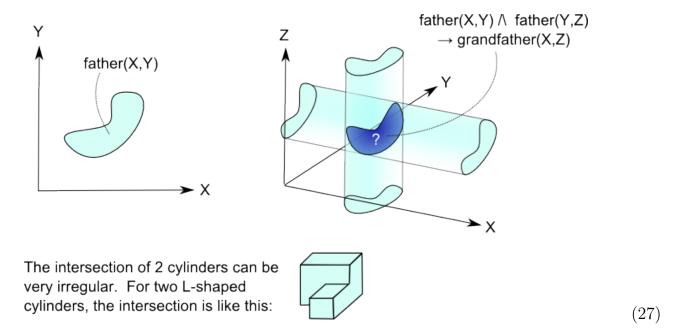
$$\frac{\text{propositional calculus}}{\text{Boolean algebra}} = \frac{\text{predicate calculus}}{\text{cylindric algebra}}$$
(25)

Higher-order logic (HOL) 的代数化可以用 topoi theory 给出 [6] [7]:

$$\frac{\text{intuitionistic propositional calculus}}{\text{Heyting algebra}} = \frac{\text{higher-order logic}}{\text{elementary topos}}$$
(26)

HOL 等效於 untyped λ -calculus, 而 typed λ -calculus (= type theory) 较为弱一点。HOL 这个家族的特点,是 "substitution of equal by equals",这会令逻辑式子的长度增加。但 predicate logic 的做法是用**实物** (objects) 来做替换,它不会增加式子的长度;但将它代数 化的结果是引入了 cylindrification、diagonal set 等概念,例如在 fig. (19) 有 $y_1 \equiv x_2$ 这个 diagonal。

所谓 cylindrification 的意思是这样的:



X,Y,Z 代表 domains,即所有「人」或「物体」(objects) 的集合。物体之间的**关系**是一些 regions(如蓝色那块平面代表 "father" 关系)。两个关系之间的 "and" 就是就是那两个 cylinders 的 intersection,所以叫 cylindric algebra。注意: 这里的 (X,Y,Z) 不同於 fig. (19) 的 (x_1,x_2,y_1) ,前者是 3 个 domain 上的 2 个关系的交集:

father
$$\wedge$$
 father (28)

,后者是 x_1 = "father" 这个 predicate 的内部结构:

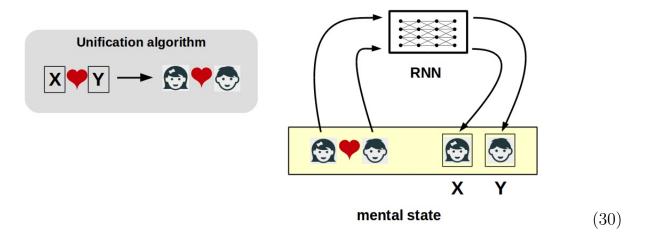
$$father(x_2, \cdot) \land \dots \mapsto grandfather(y_1, \cdot)$$
 (29)

是个 diagonal (即 linkage: $x_2 \equiv y_1$)。

(这段的 references 太多,我有空再补上....)

用时间换取空间

上面说的是 substitution 在空间中的 linkage 结构。但也可以将 substitution **分拆**成若干个简单的步骤。方法是:将某些内容放进记忆体中的「盒子」中,这些盒子充当 variables 的角色,也就是很具体地实现 substitution 的动作。换句话说,将**空间复杂性**转换成**时间复习性**;以下是示意图:



X, Y 是状态空间 $X \ni x$ 里面的「盒子」 = variables。

先前我说的 linkage 结构,放在有限维向量空间比较方便,但它是 first-order logic, 处理 higher-order 关系时有很大困难。Higher-order relations 似乎还是要用这种分拆步骤的方法解决。

2.2 结论

如上所述,适当地利用记忆体,可以不理会 linkage 的空间结构。我在这篇论文中 elucidate 了逻辑的空间结构,先前仍是一个谜,妨碍思考,但现在有了比较清晰的理解,算是一种有益的贡献吧。

Acknowledgement

谢谢 Ben Goertzel (OpenCog 人工智能的创始人) 在 AGI mailing list 上和我的讨论。Ben 初次指出神经网络学习和逻辑 inductive 学习的不同,引起我研究两者之间的关系。

References

- 1. Wikipedia: Deep dreaming (https://en.wikipedia.org/wiki/Deepdreaming).
- 2. Wikipedia: Universal approximation theorem (https://en.wikipedia.org/wiki/Universal_approximation_theorem).

[†]人脑的脑电波由 0.5 Hz 到 40 Hz 都有,我们感觉上瞬间的动作可能已经过了若干次迴路。

- 3. Robert Gilmore and Marc Lefranc. The topology of chaos: Alice in stretch and squeezeland. Wiley-VCH, 2011.
- 4. Hobbs. interpretation as abduction, in book "discourse and inference", Nov 2003.
- 5. Jerry R Hobbs, Mark Stickel, Paul Martin, and Douglas Edwards. Interpretation as abduction. In *Proceedings of the 26th annual meeting on Association for Computational Linguistics*, pages 95–103. Association for Computational Linguistics, 1988.
- 6. Joachim Lambek. Categorical versus algebraic logic. In Andréka, Monk, and Németi, editors, *Algebraic logic*, pages 351–360. North-Holland, 1988.
- 7. Saunders MacLane and Ieke Moerdijk. Sheaves in geometry and logic a first introduction to topos theory. Springer, 1992.
- 8. Roger Maddux. Relation algebras. Elsevier, 2006.
- 9. Mikolov, Sutskever, Chen, Corrado, and Dean. Efficient estimation of word representations in vector space. *Proceedings of workshop at ICLR*, 2013.
- 10. Luc De Raedt. Logical and relational learning. Springer, 2008.
- 11. Gunther Schmidt. Relational mathematics. Cambridge, 2010.
- 12. Stephen Smale. Differentiable dynamical systems. Bulletin of the American Mathematical Society, 1967.
- 13. Tamás Tél and Márton Gruiz. Chaotic dynamics: an Introduction based on classical mechanics. Cambridge, 2006.
- 14. King Yin Yan. ILP tutorial https://storage.googleapis.com/google-code-archive-downloads/v2/code.google.com/genifer/Genifer induction (30 July 2012).pdf.
- 15. King Yin Yan. The structure of memory. (to be submitted AGI-2017).
- 16. King Yin Yan, Juan Carlos Kuri Pinto, and Ben Goertzel. Wandering in the labyrinth of thinking a cognitive architecture combining reinforcement learning and deep learning. (to be submitted AGI-2017).